Фундаментальные проблемы теоретической и прикладной механики
Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского, 2011, № 4 (5), с. 2318–2320

УДК 539.3:539.61

ГРАДИЕНТНЫЕ И АДГЕЗИОНЫЕ ЭФФЕКТЫ В МЕХАНИКЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ГЕТЕРОГЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ С МИКРО- И НАНОСТРУКТУРОЙ

С.А. Лурье

Институт прикладной механики РАН, Москва

lurie@ccas.ru

Поступила в редакцию 24.08.2011

Дается классификация градиентных теорий упругости, описывающих спектр когезионных и адгезионных взаимодействий и являющихся основой моделирования масштабных эффектов в континуальной механике деформирования твердых тел. Указана общая структура адгезионных взаимодействий в континуальных моделях адгезии и дан анализ соответствующих адгезионных параметров. Обсуждается вопрос о существенности градиентных эффектов и исследуются возможности градиентных теорий при оценке механических свойств сплошных сред. Приводятся примеры моделирования неклассических свойств структурированных сред: керамик, композитов, армированных микро- и нановключениями и др.

Ключевые слова: градиентная упругость, межфазный слой, теория адгезии, нанокомпозиты, керамика, эффективные свойства.

Введение

Развитие градиентных теорий обязано оригинальным работам Коссера и последующим исследованиям механиков середины 20-го столетия. Большинство приложений градиентных теорий связано с моделированием аномальных свойств нанокомпозитов и анализом свойств миниатюрных малоразмерных структур и устройств с использованием градиентных теорий второго порядка в силу их относительной простоты. При этом оказалось, что градиентные теории являются вполне эффективными и адекватными при анализе сред с нано- и микроструктурами. Параметры, отвечающие за локальные, градиентные эффекты и рассматриваемые как дополнительные физические постоянные исследуемых материалов, в настоящее время могут быть оценены достаточно точно по дисперсионным соотношениям. С другой стороны, в [1] предлагается иная трактовка дополнительных параметров градиентных моделей, где они не являются дополнительными физическими постоянными материала, а определяют свойства промежуточного межфазного состояния. В этой ситуации роль градиентных составляющих становится несоизмеримо более существенной, особенно в структурированных средах, для которых характерна значительная протяженность межфазных границ. Подобные эффекты следует ожидать и в отношении различных физических процессов. Более того, здесь проявление «масштабных» межфазных эффектов может быть гораздо более существенным, так как многие физические параметры могут изменяться в гораздо более широких диапазонах, нежели модули упругости.

Градиентные модели. Когезионные и адгезионные взаимодействия

Математическая формулировка модели (определяющие соотношения, уравнения равновесия и краевая задача в целом) полностью определяется видом потенциальной энергии. Для физически линейной изотропной среды потенциальная энергия в объеме V и на поверхности F является квадратичной формой ее аргументов, записанной с учетом их тензорной размерности и симметрии. Для градиентных моделей второго порядка имеем [2, 3]:

$$U = \iiint U_V \, dV + \iint U_F \, dF,$$

$$U_V = U_V(d_{ij}^0; d_{ij}^{\Xi}; \Xi_{ij}), \quad U_F = U_F(d_{ij}^{\Xi}, d_{ij}^0),$$

d_{ij}^{Ξ} – тензор свободных деформаций; $d_{in,m} Э_{nmj} = \Xi_{ij}$ – плотность дислокаций; R_i – непрерывный вектор перемещений, $Э_{ijk}$ – тензор Леви-Чевита. Квадратичные слагаемые в плотности энергий деформации, содержащие тензоры свободных деформаций и псевдотензоры плотности дислокаций, определяют поля повреждений в объеме и на поверхности. Коэффициенты в квадратичных формах определяют физические свойства обобщенной среды. Показано [2], что в общем случае разрешающий оператор градиентных моделей второго порядка представляется в виде произведения оператора Ламе и обобщенного оператора Гельмгольца. В объеме тела когезионные взаимодействия определяются с точностью до двух скалярных размерных параметров (пропорциональных квадрату длины), указывающих длину двух типов когезионных взаимодействий, один из которых является сдвиговым. Градиентные эффекты характеризуются модулями, отличающимися от классических на квадрат длины. Заметим, что учет адгезионных эффектов может приводить к гораздо более существенным поправкам при определении эффективных свойств для структурированных сред, так как адгезионные модули отличаются от классических на параметр длины.

Как частный случай, развита градиентная модель межфазного слоя, в которой когезионные взаимодействия определяются в объеме одной дополнительной постоянной C:

$$U = \frac{1}{2}\iiint \left\{ 2\mu\gamma_{ij}\,\gamma_{ij} + \left(\frac{2\mu}{3} + \lambda\right)\theta^2 + Cu_i\,u_i \right\} dV +$$

$$+\frac{1}{2}\oiint [A_{ijnm} R_{n,m}\, R_{i,j} + D_{ij}\dot{R}_i \dot{R}_j] dF,$$

$$u_i = -\frac{1}{C} L_{ij}(R_j). \qquad (1)$$

Квадратичной формой $D_{ij}\dot{R}_i\dot{R}_j$, $D_{ij} = An_in_j + B(\delta_{ij} - n_in_j)$ в (1) определяется модель «поврежденной адгезии», которая может использоваться для моделирования технологических процессов функционализации поверхности. Постоянные A, B определяют свойства адгезии по нормали к поверхности и адгезионные трансверсальные свойства поверхности F. Квадратичной формой

$$A_{ijnm} R_{n,m}\, R_{i,j} = (\mu^F + \lambda^F)({}^2\theta\,{}^2\theta) +$$

$$+ 2\mu^F ({}^2\gamma_{ij}\,{}^2\gamma_{ij}) + \delta^F ({}^2\alpha_k\,{}^2\alpha_k),$$

где ${}^2\gamma_{ij}$ – «плоский» девиатор, ${}^2\theta$ – «плоский» шаровой тензор, ${}^2\alpha_i = d_{nm}n_n(\delta_{mi} - n_mn_i)$ – «плоский» вектор углов поворота поверхности при ее изгибе, дается модель «идеальной» поверхности в механике деформируемых тел. В общем случае модули в этой модели определяются тремя физическими постоянными. Показывается, что построенная адгезионная модель обобщает известную модель Янга–Лапласа (постоянные $(\mu^F + \lambda^F)$, μ^F) и «пружинные» модели, описывает эффекты капиллярности (постоянная δ^F), дает обобщение уравнению Юнга (мениск), учитывая влияние деформируемости тела на его поверхностные свойства.

Прикладные проблемы. Выводы

Показано [1], что для фактически любых однородных материалов учет градиентных эффектов дает ничтожные поправки при оценке механических характеристик и размерный параметр градиентности, существенно меньше равновесного межатомного расстояния. С другой стороны, показано, что для неоднородных структур с высокой плотностью границ роль масштабных факторов многократно возрастает и градиентные эффекты нельзя не учитывать. Градиентная континуальная модель с одним градиентным параметром (на два порядка больше, чем для однородных сред) описывает весь спектр неоднородных дискретных структур (сравниваются модули упругости K_{eff} и K) с высокой точностью (погрешность менее 0.01%). Рисунок 1, где представлен прогноз свойств (относительный модуль упругости) кристаллов Леннарда-Джонса, показывает отличное совпадение результатов континуального и дискретного моделирования (дискретные значки) для всех типов «композитных» материалов с ячейкой периодичности, определяемой фрагментом, содержащим разное количество атомов n_1, n_2 разных сортов ($\varepsilon_2/\varepsilon_1 = 100$; $\sigma_2/\sigma_1 = 2$; ε, σ – энергия и равновесное расстояние в потенциале Леннарда-Джонса).

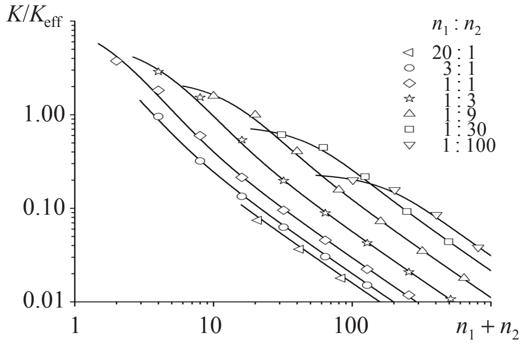

Рис. 1

Представлены конкретные примеры моделирования аномальных механических характеристик реальных дисперсных нанокомпозитов, керамик, дается прогноз термомеханических характеристик и теплопроводности полимерно-кристаллических структур. Анализируются особенности численной реализации градиентных моделей. Полученные теоретические оценки демонстрируют эффективность градиентных моделей при моделировании свойств наноструктур.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №09-01-00060, и программы Президиума РАН-21.

Список литературы

1. Gusev A.A., Lurie S.A. // Advanced Engineering Materials. 2010. V. 12, No 6. P. 529–533.
2. Lurie S.A., Volkov-Bogorodsky D.B., Zubov V.I., Tuchkova N.P // Comp. Mat. Sc. 2009. V. 45, No 3. P. 709–714.
3. Белов П.А., Лурье С.А. // ПММ. 2009. Т. 73, №5. С. 833–848.

GRADIENT AND ADHESION EFFECTS IN THE MECHANICS OF DEFORMABLE HETEROGENEOUS MATERIALS WITH MICRO- AND NANOSTRUCTURES

S.A. Lurie

A classification of the gradient theories of elasticity, describing the spectrum of cohesive and adhesive interactions in the continual mechanics of solids is given. The structure of the adhesive interactions in the continuum mechanical model and an analysis of the adhesion parameters are shown. The gradient effects and their influence on the physical and mechanical properties of microstructured materials are discussed. Some examples of modeling the non-classical effects for structured media (ceramics, nanocomposites and etc.) are given.

Keywords: gradient elasticity, interphase layer, adhesion theory, nano-composites, ceramics, effective properties.